

Synthèse : Dynamique quantique pour un spectre fractal - Coefficient de Thouless - Formule de Thouless et étude du RMS pour le tight-binding model

Ce document regroupe toutes les notes dont je dispose sur la dynamique quantique pour un spectre de Cantor triadique : le calcul de la probabilité de retour à l'origine pour un un paquet d'onde (cas général), l'étude du coefficient de Thouless, puis l'étude du modèle du tight-binding : formule de Thouless et étude du RMS.

Par la suite, on notera K l'ensemble de Cantor triadique, construit à partir du segment $[0, 1]$, et $d\mu$ la mesure appropriée associée. $d\mu$ vérifie :

$$\int_k f(x)d\mu(x) = \frac{1}{2} \int_k f\left(\frac{x}{3}\right) d\mu(x) + \frac{1}{2} \int_k f\left(\frac{x+2}{3}\right) d\mu(x) \quad (1)$$

Probabilité de retour à l'origine

cf. correlation-fun-cantor.pdf

Coefficient de Thouless

Le coefficient de Thouless pour un système quantique dont le spectre en énergie est K est défini par : $\gamma(x) = \int_K \ln |y - x| d\mu(y)$. Par application de (1), on montre que $\gamma(x)$ vérifie les équations fonctionnelles suivantes :

$$\gamma(x/3) = \begin{cases} -\ln 3 + \frac{1}{2}\gamma(x) + \frac{1}{2} \int_K \ln |x - y - 2| d\mu(y) \\ -\ln 3 + \frac{1}{2}\gamma(x) + \frac{1}{2} \int_K \ln |x - y + 2| d\mu(y) \end{cases}$$

En appliquant une transformation de Mellin a ces égalités, on en déduit que γ comporte des oscillations log-périodiques (voir fig. 1). De plus, γ a la symétrie suivante : $\gamma(x) = \gamma(1 - x)$.

Formule de Thouless et dynamique quantique dans le modèle du tight-binding - application au RMS

Modèle du tight-binding : on considère une lattice 1D constituée de N sites espacés de 1, N pouvant être infini a priori. Équation de Schrodinger discrétisée :

$$-\phi_n(k+1) - \phi_n(k-1) + 2\phi_n(k) + V(k)\phi_n(k) = E_n\phi_n(k)$$

avec $\phi_n = (\phi_n(0), \phi_n(1), \dots, \phi_n(N))$ une solution propre associée à la valeur propre E_n ; on a ajouté le site 0 avec pour conditions : $\phi_n(0) = 0$ et la normalisation : $\sum_k |\phi_n(k)|^2 < \infty$.

Formule de Thouless

On suppose ici que la lattice est finie : $N < \infty$.

Exprimée matriciellement dans la base $\{|k\rangle\}_{1,N}$ avec $|k\rangle = (\delta_{j,k})_{j=1,N}$, l'équation de Schrodinger s'écrit : $H_N\phi_n = E_n\phi_n$ avec

$$H_N = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -1 & 2+V(1) & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \cdots & \cdots & -1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 2+V(N) \end{pmatrix}$$

On utilise la matrice de Green : $G(E) = (EI - H_N)^{-1}$, pour exprimer les corrélations spatiales de ϕ_n en terme de fonctions spectrales.

D'une part :

$$G_{1N}(E) = \sum_{n=1}^N \frac{\phi_n^*(1)\phi_n(N)}{E - E_n}$$

et d'autre part, en utilisant la formule d'inversion matricielle :

$$G_{1N}(E) = \frac{(-1)^{N+1}}{\prod(E - E_n)} \text{Cof}_{N1}(EI - H_N)$$

avec $\text{Cof}_{N1}(EI - H_N) = (-1)^{N+1}$. En identifiant les deux égalités ci-dessus, en multipliant par $(E - E_n)$ et en évaluant en $E = E_n$, il vient :

$$|\phi(1)\phi(N)| = \frac{1}{\prod_{k \neq n} |E_k - E_n|}$$

puis

$$\frac{1}{N} \ln |\phi_n(1)\phi_n(N)| = -\frac{1}{N} \sum_{k \neq n} \ln |E_k - E_n|$$

Dans le cas où le spectre est un ensemble de Cantor, et avec $N = 2^m$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln |\phi_n(1)\phi_n(N)| &= -\frac{1}{2^m} \sum_{k \neq n} \ln |E_k - E_n| \\ &\simeq -\frac{3^m}{2^m} \sum_{k \neq n} \int_{E_k}^{E_k+3^{-m}} \ln |x - E_n| dx \\ &\simeq -\int_K \ln |x - E_n| d\mu(x) \\ &= -\gamma(E_n) \end{aligned}$$

On a donc finalement :

$$\frac{1}{N} \ln |\phi_n(1)\phi_n(N)| = -\gamma(E_n) \quad (2)$$

On va maintenant appliquer cette formule a l'étude des propriétés dynamiques du paquet d'onde.

Dynamique quantique d'un paquet d'onde - Etude du RMS

On s'intéresse maintenant à la dynamique d'un paquet d'onde $\psi(t)$, dont l'évolution est régie par l'équation de Schrodinger : $i\frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t)$, et localisé à $t = 0$ en $k = k_0$: $\langle k|\psi(t=0)\rangle = \delta(k - k_0)$. Après un temps t , le système est dans l'état : $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$; la valeur de la fonction d'onde en un site k est donné par :

$$|\psi(k, t)| = \int_K \phi_\epsilon(k_0)^* \phi_\epsilon(k) e^{-i\epsilon t}$$

Nous distinguons deux cas : une lattice finie et une lattice infinie. Dans chacun des cas, les propriétés dynamiques du système découlent du comportement des moments :

$$h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} \epsilon^k d\mu(\epsilon)$$

Cependant, dans le cas fini, on dispose de plus de la formule de Thouless démontrée au paragraphe précédent, ce qui donne plus d'informations.

Cas d'une lattice infinie

On considère une lattice de taille infinie. Équation de Schrodinger discrétisée :

$$-\phi_E(k+1) - \phi_E(k-1) + 2\phi_E(k) + V(k)\phi_E(k) = E\phi_E(k)$$

avec $\phi_E = (\phi_E(0), \phi_E(1), \dots, \phi_E(N), \dots)$ une solution propre associée à la valeur propre E ; on a ajouté le site 0 avec pour conditions : $\phi_E(0) = 0$ et la normalisation : $\sum |\phi_E(k)|^2 < \infty$. On n'explicite pas le potentiel V ; l'on suppose uniquement que le spectre en énergie est un ensemble de Cantor triadique.

On utilise le formalisme des matrices de transfert pour calculer les $\phi_E(k)$ de proche en proche : soient les matrices

$$M_k(E) = \begin{pmatrix} 2 + V_k - E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

telles que : $\begin{pmatrix} \phi_E(k) \\ \phi_E(k-1) \end{pmatrix} = M_k(E) \begin{pmatrix} \phi_E(k) \\ \phi_E(k-1) \end{pmatrix}$

Posons : $\begin{pmatrix} p_k(E) & q_k(E) \\ p_{k-1}(E) & q_{k-1}(E) \end{pmatrix} = \prod_{j=k}^1 \begin{pmatrix} p_j(E) & q_j(E) \\ p_{j-1}(E) & q_{j-1}(E) \end{pmatrix}$.

La suite de polynômes $\{p_k\}_k$ vérifie la relation de récurrence :

$$p_{k+1}(E) = (2 + V_{k+1} - E)p_k(E) - p_{k-1}(E)$$

avec conditions initiales : $\begin{cases} p_1(E) = 2 + V_1 - E \\ p_0(E) = 1 \end{cases}$

Comme, par hypothèse, $\phi_E(0) = 0$, on a pour toute énergie E et tout site k :

$$\phi_E(k) = p_k(E)\phi_E(1)$$

$\phi_E(1)$ est fixé par la condition de normalisation :

$$\phi_E(1) = \frac{1}{\sqrt{\sum_k |p_k(E)|^2}}$$

On peut aussi choisir d'imposer une valeur constante pour $\phi_E(1)$, et définir le spectre comme toutes les énergies E telles que l'orbite de $(p_k(E))_k$ soit bornée (cf. [1], [2]) ; pour un potentiel de Fibonacci, le spectre est alors de type Cantor.

On peut donc voir les valeurs prises par fonctions propres ϕ_E en les sites k comme des polynômes en E , que multiplie une certaine fonction ($\frac{1}{\sqrt{\sum_k |p_k(E)|^2}}$ si l'on prend la condition de normalisation, ou une constante $\phi_E(1) = c_0$ dans l'autre cas). Il suffit donc, comme on le verra sur l'exemple du RMS, d'étudier les fonctions :

$$h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} \epsilon^k d\mu(\epsilon)$$

Appliquons ceci à l'étude du RMS $\Delta x(t)$, défini par :

$$\Delta x(t)^2 = \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |\psi(k, t)|^2$$

On a :

$$\begin{aligned} \Delta x(t)^2 &= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left| \int_K e^{i\epsilon t} \phi_{\epsilon}^*(k_0) \phi_{\epsilon}(k) d\mu(\epsilon) \right|^2 \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left| \int_K e^{i\epsilon t} |\phi_{\epsilon}(1)|^2 p_k(\epsilon) p_{k_0}(\epsilon) \right|^2 d\mu(\epsilon) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |j_{k+k_0}(t)|^2 \end{aligned}$$

$$\text{avec } j_{k+k_0}(t) = \int_K e^{i\epsilon t} |\phi_{\epsilon}(1)|^2 p_k(\epsilon) p_{k_0}(\epsilon) d\mu(\epsilon).$$

Comme p_k est un polynôme de degré k , on peut développer $p_k(\epsilon) p_{k_0}(\epsilon)$ en somme de monômes : $p_k(\epsilon) p_{k_0}(\epsilon) = \sum_{j_k \leq k, j_{k_0} \leq k_0} c_{j_k, k} c_{j_{k_0}, k_0} \epsilon^{j_k + j_{k_0}}$.

$\Delta x(t)^2$ est donc une combinaison linéaire de termes de la forme : $h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} |\phi_{\epsilon}(1)|^2 \epsilon^k d\mu(\epsilon)$. Il suffit donc d'étudier $h_k(t)$ pour en déduire le comportement du RMS.

La transformée de Mellin de $h_k(t)$ a des pôles de la forme : $s_{m, k} = k + \frac{\ln 2}{\ln 3} + \frac{2i\pi m}{\ln 3}$ (voir détail du calcul en annexe) ; en conséquence, $h_k(t)$ est de la forme :

$$h_k(t) = t^{-k - \ln 2 / \ln 3} \sum_{m \in \mathbb{Z}} t^{-2i\pi m / \ln 3} e^{-i\pi s_{m, k} / 2} r_{k, m} \Gamma_{s_{m, k}}$$

avec Γ la fonction gamma d'Euler et $r_{k, m}$ des coefficients complexes.

Donc, $\Delta x(t)^2$ est une combinaison linéaire de termes de la forme $t^{-k - \ln 2 / \ln 3} G_k(\ln t)$, où les $G_k(\ln t)$ sont des fonctions périodiques de $\ln t$, de période $\ln 3$:

$$\Delta x(t) = \sqrt{t^{-\ln 2 / \ln 3} \sum_{k \in \mathbb{Z}} k^2 \sum_{0 \leq l_k \leq k} d_{l_k} t^{-l_k} G_{l_k}(\ln t)}$$

Cette formule montre que $\Delta x(t)$ a une composante log-périodique. Cependant, il faudrait étudier plus en détail les coefficients d_{l_k} (issus du réarrangement des termes

en monômes de même degré dans $j_{k+k_0}(t)$ et du calcul des $p_k(\epsilon)$ pour connaître le comportement global (croissant, décroissant, présence ou non d'une loi de puissance globale) du RMS.

Cas d'une lattice finie

On considère maintenant une lattice finie, constituée de $N+1$ sites. On impose de plus les conditions aux limites (Dirichlet) : $\phi_E(0) = 0$ et $\phi_E(N) = a$. Le raisonnement avec les matrices de transfert utilisé précédemment est toujours valide : les fonctions propres sont de la forme : $\phi_E(k) = p_k(E)\phi_E(1)$. Par ailleurs, la formule de Thouless donne : $\frac{1}{N} \ln |\phi_E(1)\phi_E(N)| = -\gamma(E)$, d'où : $\phi_E(1) = \frac{1}{\phi_E(N)} e^{-N\gamma(E)} = \frac{1}{a} e^{-N\gamma(E)}$. Finalement, on a l'expression suivante pour les fonctions d'onde :

$$\phi_E(k) = \frac{1}{a} p_k(E) e^{-N\gamma(E)}$$

De même que dans le cas infini, on peut ramener l'étude du RMS à l'étude des fonctions : $h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} \epsilon^k e^{-N\gamma(\epsilon)} d\mu(\epsilon)$. Le passage par les transformées de Mellin permettent de même de montrer que $\Delta x(t)$ a une composante log-périodique.

Résultats numériques

J'ai étudié numériquement deux situations, dans le cadre du modèle du tight-binding : un système avec un spectre de Cantor triadique, et un autre avec un potentiel de Fibonacci V . Dans le second cas, j'ai comparé les graphes du RMS issu du calcul théorique et du calcul direct, et testé la validité de la formule : $\phi_E(k) = \frac{1}{a} p_k(E) e^{-N\gamma(E)}$.

RMS pour un spectre de Cantor triadique

La figure 2 montre le graphe de la fonction $h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} \epsilon^k d\mu(\epsilon)$ pour $k = 0$ pour un spectre de Cantor triadique.

La figure 3 est le graphe du RMS dans le cas d'un spectre de Cantor, calculé à partir de l'expression simplifiée suivante pour les fonctions propres :

$$\phi_E(k) = E^k \phi_E(1)$$

$$\text{et } \phi_E(1) = \frac{1}{\text{sqr}t \sum |p_k(E)|^2} = \sqrt{1 - E^2}.$$

RMS pour un potentiel de Fibonacci; application de la formule de Thouless

On étudie maintenant le cas d'un système régi par un potentiel V de Fibonacci, construit de la manière suivante : en notant F_N le N -ième nombre de la suite de Fibonacci et S_N la séquence $(V_k)_{k=1, \dots, N}$ donnant la valeur V_k du potentiel en les sites $1 \leq k \leq F_N$, on construit les S_N récursivement : $S_{N+1} = [S_N, S_{N-1}]$, avec $S_1 = V_A$ et $S_2 = V_B$. Pour les calculs, on a pris : $V_A = -V_B = 0.6$, et on construit une lattice de 233 sites. Le Hamiltonien H_N du système est représenté par une matrice tridiagonale, de la forme de celle donnée dans le paragraphe sur le coefficient de Thouless, et définie à partir du potentiel V . Les valeurs propres et vecteurs propres du système sont ceux de H_N . La figure 4 montre le spectre du système.

On construit par ailleurs les polynômes $p_k(E)$ à partir de la relation de récurrence :

$$p_{k+1}(E) = (2 + V_{k+1} - E)p_k(E) - p_{k-1}(E)$$

$$\text{avec conditions initiales : } \begin{cases} p_1(E) = 2 + V_1 - E \\ p_0(E) = 1 \end{cases}$$

La figure 5 compare les graphes de $|\phi_E(1)|$ avec le graphe de $a * e^{-F_N|\gamma(E)|}$, où a est un paramètre correspondant à la valeur de la fonction d'onde au site F_N . A une constante additive près, les graphes ont des structures proches : pics localisés aux mêmes énergies, même variations. Je ne sais pas d'où provient l'écart entre les graphes ; cela provient peut-être juste des approximations numériques faites pour le calcul de $\gamma(E)$ par matlab.

La figure 6 compare les graphes de la fonction propre pour l'énergie la plus basse, $\phi_{E_0}(k)$, en fonction de k , avec le graphe obtenu avec la formule théorique : $\phi_{E_0}(k) = \frac{1}{a}p_k(E_0)e^{-N\gamma(E_0)}$.

Enfin, les figures 7,8 comparent les graphes du RMS calculé directement à partir des fonctions propres et obtenu avec la formule théorique $\phi_E(k) = \frac{1}{a}p_k(E)e^{-N\gamma(E)}$ pour les fonctions propres.

Annexe

Calcul de $h_k(t)$

On calcule ici les fonctions de la forme : $h_k(t) = \int_K e^{iet} |\phi_\epsilon(1)|^2 \epsilon^k d\mu(\epsilon)$, avec $k \in \mathbb{N}$.

Transformée de Mellin :

$$\begin{aligned} m_k(s) &= \int_0^\infty t^{s-1} h_k(t) dt \\ &= \int_K d\mu(\epsilon) |\phi_\epsilon(1)|^2 \epsilon^k \int_0^\infty t^{s-1} e^{iet} dt \\ &= \Gamma(s) e^{-i\pi s/2} \underbrace{\int_K d\mu(\epsilon) |\phi_\epsilon(1)|^2 \epsilon^{k-s}}_{l_k(s)} \end{aligned}$$

avec Γ la fonction gamma d'Euler. Maintenant :

$$\begin{aligned} l_k(s) &= \int_K d\mu(\epsilon) |\phi_\epsilon(1)|^2 \epsilon^{k-s} \\ &= \frac{1}{2} \int_K d\mu(\epsilon) |\phi_{\frac{\epsilon}{3}}(1)|^2 \frac{\epsilon^{k-s}}{3^{k-s}} + \frac{1}{2} \int_K d\mu(\epsilon) |\phi_{\frac{\epsilon+2}{3}}(1)|^2 \frac{(\epsilon+2)^{k-s}}{3^{k-s}} \end{aligned}$$

Par ailleurs : $|\phi_\epsilon(1)|^2 = \frac{1}{\sum_k |p_k(\epsilon)|^2} = c_0 + \mathcal{O}(\epsilon)$, c_0 étant une constante ; on fait donc l'approximation : $|\phi_{\frac{\epsilon}{3}}(1)|^2 \frac{\epsilon^{k-s}}{3^{k-s}} \simeq |\phi_\epsilon(1)|^2 \frac{\epsilon^{k-s}}{3^{k-s}}$. Si l'on choisit les conditions aux limites "mixtes" : $\phi_\epsilon(0) = 0$, $\phi_\epsilon(1) = a$ cela tient aussi. Donc :

$$\begin{aligned}
l_k(s) &\simeq c_0 \int_K d\mu(\epsilon) \epsilon^{k-s} \\
&= \frac{1}{2} \int_K d\mu(\epsilon) \frac{\epsilon^{k-s}}{3^{k-s}} + \underbrace{\frac{1}{2} \int_K d\mu(\epsilon) \frac{(\epsilon+2)^{k-s}}{3^{k-s}}}_{r_k(s)} \\
&= \frac{3^{s-k}}{2} l_k(s) + r_k(s)
\end{aligned}$$

$r_k(s)$ n'a pas de pôles car $\epsilon + 2$ ne s'annule pas sur K . Donc :

$$l_k(s) = \frac{r_k(s)}{1 - 3^{s-k}/2}$$

Les pôles de $l_k(s)$ sont de la forme : $s_{m,k} = k + \frac{\ln 2}{\ln 3} + \frac{2i\pi m}{\ln 3}$. En appliquant la transformée de Mellin inverse, on a donc :

$$h_k(t) = t^{-k - \ln 2 / \ln 3} \sum_{m \in \mathbb{Z}} t^{-2i\pi m / \ln 3} e^{-i\pi s_{m,k}/2} r_{k,m} \Gamma(s_{m,k})$$

Références

- [1] D. Wurtz, T. Schneider, A. Politi, Phys. Lett. A vol 129 number 2, 9 May 1988
- [2] H. Hiramoto, M. Kohmoto, International Journal of Modern Physics B, Vol 6, Nos 3 - 4 (1992) 281-320

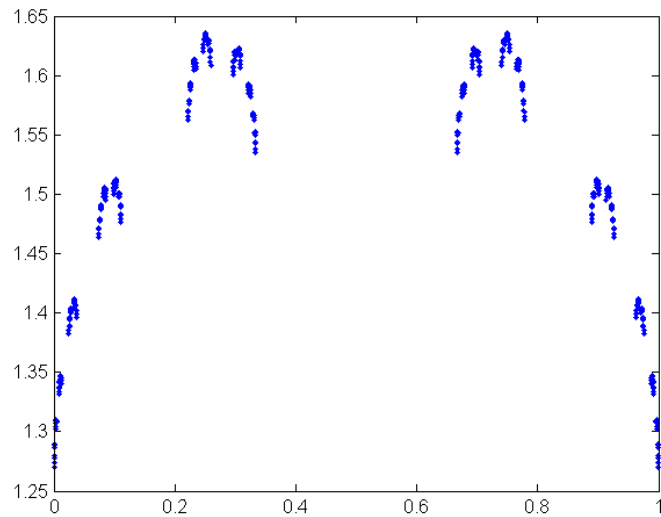


FIGURE 1 – coefficient de Thouless

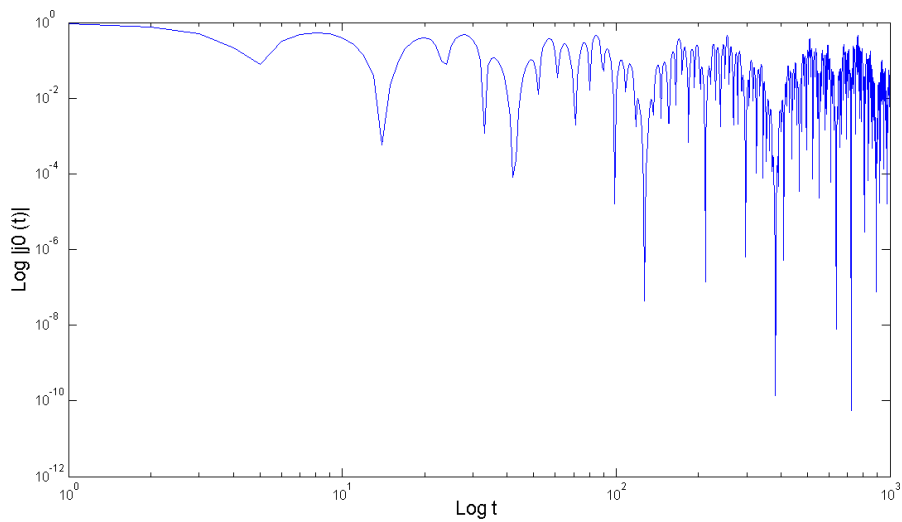


FIGURE 2 – $j_0(t)$ pour un spectre de Cantor triadique

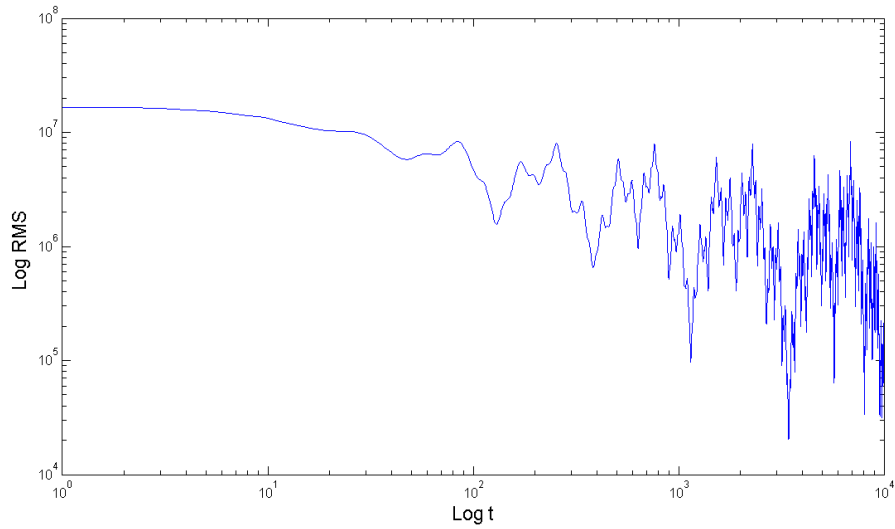


FIGURE 3 – Graphe théorique du RMS, avec une expression simplifiée, pour un spectre de Cantor triadique

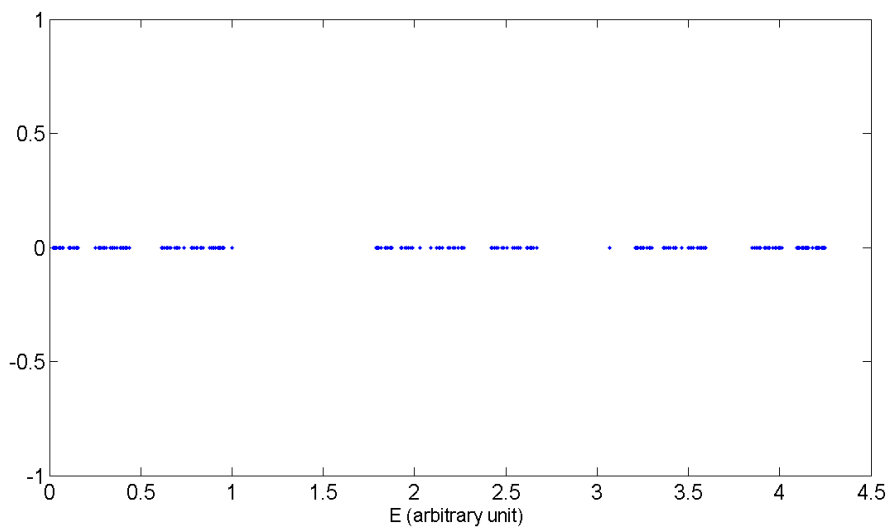


FIGURE 4 – Spectre associé au potentiel de Fibonacci, pour un système de 233 sites.

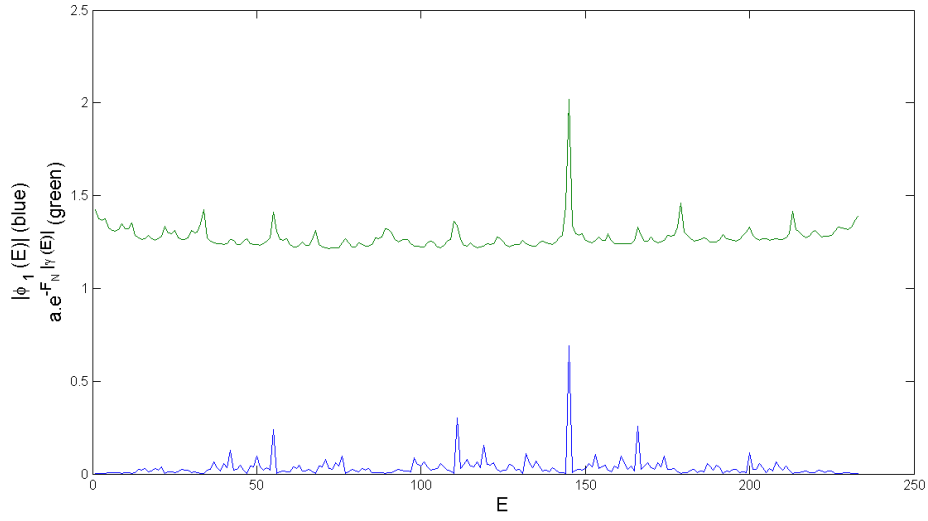


FIGURE 5 – Bleu : module de $\phi_E(1)$; Vert : $a * e^{-F_N |\gamma(E)|}$ pour un potentiel de Fibonacci.

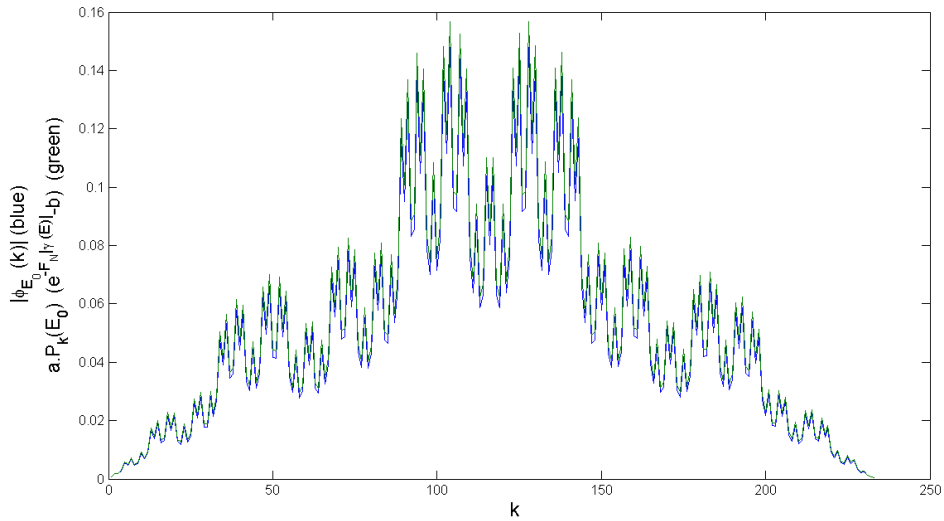


FIGURE 6 – Bleu : module de $\phi_{E_0}(k)$; Vert : $a * (e^{-F_N |\gamma(E_0)|} - b)$ pour un potentiel de Fibonacci. b est un paramètre correctif (pour compenser l'écart observé fig. 5)

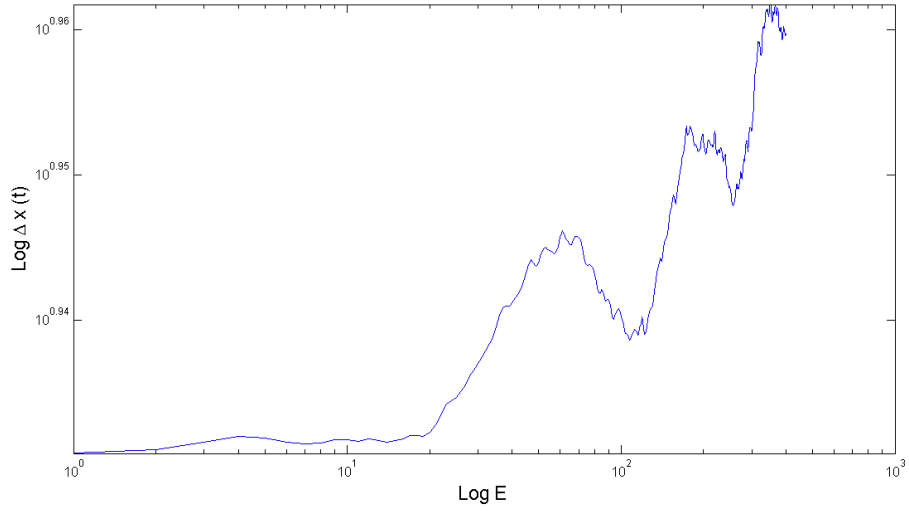


FIGURE 7 – $\Delta x(t)$ pour un potentiel de Fibonacci

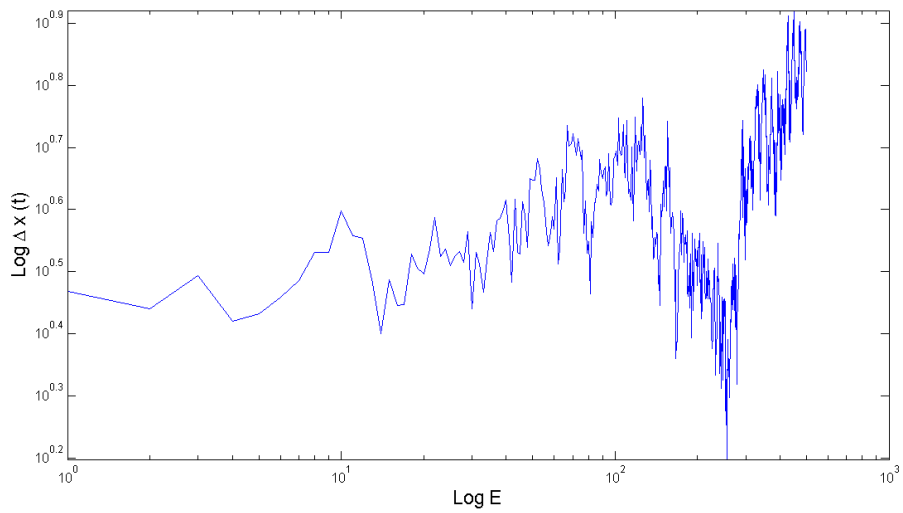


FIGURE 8 – $\Delta x(t)$ théorique pour un potentiel de Fibonacci